

Навчально-науковий інститут біології, хімії та біоресурсів
(назва інституту)

Кафедра

хімії та експертизи харчової продукції

(назва кафедри)

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Директор навчально-наукового інституту біології, хімії та біоресурсів



Руслан БЕСПАЛЬКО

«09» серпня 2025 року

РОБОЧА ПРОГРАМА
навчальної дисципліни

Комп'ютерна хімія

(назва навчальної дисципліни)

обов'язкова

(вказати: обов'язкова / вибіркова)

Освітньо-професійна програма

«Хімія»

(вказати назву ОПП)

Спеціальність

ЕЗ «Хімія»

(вказати: код, назва)

Галузь знань

Е «Природничі науки, математика та статистика»

(вказати: шифр, назва)

Рівень вищої освіти

Другий (магістерський)

(вказати: перший бакалаврський/другий магістерський)

Навчально-науковий інститут біології, хімії та біоресурсів

(назва факультету/інституту, на якому здійснюється підготовка фахівців за вказаною освітньо-професійною програмою)

Мова навчання

Українська

(вказати: якою мовою читається дисципліна)

Робоча програма навчальної дисципліни *Комп'ютерна хімія* складена відповідно до освітньо-професійної програми «Хімія».

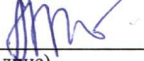
Розробники: Дійчук Володимир Васильович, асистент кафедри хімії та експертизи харчової продукції, к.х.н., доцент
(П.І.Б. авторів, посада, науковий ступінь, вчене звання)

Викладачі: Дійчук Володимир Васильович, асистент кафедри хімії та експертизи харчової продукції, к.х.н., доцент
(П.І.Б. авторів, посада, науковий ступінь, вчене звання)

Погоджено з гарантом ОП  Олег КОПАЧ


Затверджено на засіданні кафедри хімії та експертизи харчової продукції

Протокол № 1 від 27 серпня 2025 року

Завідувач кафедри  Анастасія САЧКО
(підпис) (прізвище та ініціали)

Схвалено методичною радою Навчально-науковий інституту біології, хімії та навчально-наукового інституту біоресурсів

Протокол № 1 від 29 серпня 2025 року

Голова методичної ради  Галина МОСКАЛИК
(підпис) (прізвище та ініціали)

Пояснювальна записка

Мета навчальної дисципліни: формування у здобувачів освіти системних знань і практичних навичок з використання комп'ютерних методів та програмного забезпечення для моделювання будови, властивостей і реакцій хімічних сполук та матеріалів, що дозволяє вирішувати наукові й прикладні задачі сучасної хімії.

Пререквізити

Дисципліна базується на знаннях, отриманих здобувачами вищої освіти з матеріалів курсів, таких як: «Основи інформатики», «Органічна хімія», «Квантова хімія».

Результати навчання:

Відповідно до ОПП «Хімія» вивчення дисципліни сприяє формуванню у здобувачів другого (магістрського) рівня вищої освіти таких компетентностей:

Загальні компетентності

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

Фахові компетентності

ФК 1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.

ФК 2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.

ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

Вивчення цієї навчальної дисципліни забезпечує досягнення здобувачем наступних *результатів навчання*:

ПРН 5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.

ПРН 9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.

У результаті вивчення дисципліни здобувачі вищої освіти повинні:

знати: основні поняття комп'ютерної хімії, сучасні методи моделювання фізико-хімічних властивостей речовин, методи молекулярної механіки, базові та напівемпіричні методи;

вміти: користуватися програмними пакетами для побудови та оптимізації молекулярних структур; розраховувати енергетичні характеристики; моделювати хімічні реакції та механізми

Опис змісту робочої програми навчальної дисципліни

Загальна інформація

Форма навчання	Рік підготовки	Семестр	Кількість		Кількість годин						Вид підсумкового контролю
			кредитів	годин	Лекції	практичні	семінарські	лабораторні	самостійна робота	індивідуальні завдання	
Денна	1	2	4	120	14	-	-	16	88	2	екзамен

Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	усього	у тому числі				
		л	п	лб	інд	с.р.
Теми та план лекційних занять	Змістовий модуль 1					
<u>Тема 1.1.</u> Вступ до комп'ютерної хімії. Основні напрямки та програмне забезпечення	18	2		2		14
<u>Тема 1.2.</u> Молекулярна механіка, просторова будова і властивості молекул	16	2				14
<u>Тема 1.3.</u> Напівемпіричні та ab initio методи та їх застосування.	18	2		2		14
<u>Тема 1.4.</u> Візуалізація просторової структури молекул та моделювання хімічних реакцій	16	2		4		10
Разом за ЗМ 1	68	8		8		52
Теми та план лекційних занять	Змістовий модуль 2					
<u>Тема 2.1.</u> Можливості та застосування редактора ChemSketch.	18	2		4		12
<u>Тема 2.2.</u> Застосування програмного пакета HyperChem.	18	2		2	2	12
<u>Тема 2.3.</u> Основи роботи в програмі Gaussian.	16	2		2		12
Разом за ЗМ 2	52	6		8	2	36
Усього годин	120	14		16	2	88

Тематика та зміст лабораторних занять

№ з/п	Назва теми (завдання)
1.	Ознайомлення з програмними пакетами ChemOffice, Avogadro, ChemSketch.
2.	Приклади застосування ChemSketch
3.	Застосування меню «Template Window» для швидкого набору формул
4.	Застосування ChemBasic для швидкого набору формул
5.	Застосування ACD/3D Viewer
6.	Приклади застосування HyperChem
7.	Основи роботи в програмі Gaussian

Зміст завдань для самостійної роботи

№ з/п	Назва тем
1	Опрацювання теоретичного матеріалу
2	Підготовка до лабораторних занять
3	Аналіз наукових публікацій із застосуванням комп'ютерної хімії
4	Моделювання будови та властивостей вибраної молекули чи системи
5	Підготовка до екзамену

Контроль виконання та оцінювання завдань, винесених на самостійне опрацювання, проводиться в процесі вивчення тем кожного змістовного модуля.

Методи навчання

Для викладання матеріалів з навчальної дисципліни «Комп'ютерна хімія» використовуються наступні методи навчання.

Словесні методи навчання. Навчальна лекція

За допомогою цього методу забезпечується усне викладення матеріалу. В ході лекції використовуються прийоми усного викладення інформації, підтримання уваги протягом тривалого часу, активізації мислення студентів, прийоми забезпечення логічного запам'ятовування, переконання, аргументації, доказів, систематизації й узагальнення.

Індуктивний метод навчання

Цей метод навчання використовується в рамках лекційних занять, коли матеріал носить, здебільшого, фактичний характер. У рамках лабораторних занять метод застосовується при виконанні лабораторних робіт, коли студенти використовують раніше здобуті теоретичні знання.

Репродуктивний метод навчання

Метод навчання використовується в рамках лекційних і лабораторних занять, а також під час самостійної роботи студентів. Метод передбачає роботу студентів за визначеним алгоритмом. Згідно з методом для виконання завдань студентам надаються методичні вказівки, правила.

Проблемно-пошукові методи навчання

Проблемно-пошукові методи застосовуються в ході проблемного навчання, а саме в процесі виконання лабораторних робіт та індивідуальних науково-дослідних завдань. Варто зауважити, що під проблемною ситуацією треба вважати невідповідність між тим, що вивчається і вже вивченим. За використання проблемно-пошукових методів навчання викладач використовує такі прийоми: створює проблемну ситуацію (ставить питання, пропонує задачу, експериментальне завдання), організовує колективне обговорення можливих підходів до рішення проблемної ситуації, стимулює висування гіпотез, тощо. Студенти роблять припущення про шляхи вирішення проблемної ситуації, узагальнюють раніше набуті знання, виявляють причини явищ, пояснюють їхнє походження, вибирають найбільш раціональний варіант вирішення проблемної ситуації. Викладач обов'язково керує цим процесом на всіх етапах, а також за допомогою запитань-підказок. Також цей метод використовується під час опрацювання матеріалів у системі дистанційної освіти «Moodle».

Наочний метод навчання

Наочний метод достатньо важливий для студентів, оскільки забезпечує візуальне подання навчального матеріалу, зокрема, з використанням інформаційно-комунікаційних технологій. При викладанні дисципліни наочний метод навчання поєднується зі словесними методами для представлення інформації у вигляді таблиць, рисунків, схем та діаграм.

Система контролю та оцінювання

У процесі вивчення навчальної дисципліни «Комп'ютерна хімія» використовуються наступні **методи контролю навчальних досягнень студентів:**

- усний контроль (в ході опитування, бесіди);
- письмовий контроль (контрольна робота в письмовій формі);
- комбінований контроль;
- тестовий контроль;
- лабораторний контроль (захист лабораторних робіт).

Формою підсумкового контролю є екзамен.

Критерії оцінювання результатів навчання з навчальної дисципліни «Комп'ютерна хімія» на поточному та підсумковому контролі

Розподіл балів, які отримує студент

Поточне оцінювання (аудиторна та самостійна робота)						К-сть балів (екзамен)	Сумарна к-ть балів	
Змістовий модуль 1				Змістовий модуль 2			40	100
T 1.1	T 1.2	T 1.3	T 1.4	T 2.1	T 2.2	T 2.3		
8	8	9	9	9	9	8		

Підсумкова оцінка, як показник результатів вивчення навчальної дисципліни, складається із сумарної кількості балів за поточне оцінювання – **60 балів** та підсумкового модуль-контролю (екзамену) – **40 балів**, за **100-бальною університетською шкалою**, яка переводиться відповідно у національну шкалу («незадовільно», «задовільно», «добре», «відмінно») та шкалою європейської кредитно-трансферної системи (ЄКТС) (F, FX, E, D, C, B, A).

Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Оцінка за національною шкалою	Оцінка за шкалою ЄКТС	
	Оцінка (бали)	Пояснення за розширеною шкалою
Відмінно	A (90-100)	Відмінно
Добре	B (80-89)	дуже добре
	C (70-79)	Добре
Задовільно	D (60-69)	Задовільно
	E (50-59)	Достатньо
Незадовільно	FX (35-49)	(незадовільно) з можливістю повторного складання
	F (1-34)	(незадовільно) з обов'язковим самостійним повторним опрацюванням освітнього компонента до перескладання

Перелік питань для самоконтролю й контролю навчальних досягнень студентів з дисципліни «Комп'ютерна хімія»

1. Що таке комп'ютерна хімія та які її основні напрямки?
2. Які завдання вирішує комп'ютерна хімія в сучасній науці та промисловості?
3. Назвіть основні програмні пакети, що використовуються для молекулярного моделювання.
4. Поясніть різницю між молекулярною механікою та квантовою хімією.

5. Чим відрізняються методи *ab initio* та напівемпіричні?
6. Поясніть принципи теорії функціонала густини (DFT).
13. Які основні терміни потенціальної енергії враховує молекулярна механіка?
14. Що таке силові поля і які їх види ви знаєте?
15. Як проводиться молекулярна динаміка і які параметри при цьому відстежують?
16. Що таке потенціальна енергетична поверхня (PES) і як її будують?
17. Як визначити перехідний стан хімічної реакції?
18. Поясніть, як за допомогою комп'ютерних методів прогнозують ІЧ- та УФ-спектри.
19. Які параметри можна отримати для термодинамічного аналізу молекул?
20. Як створити молекулу у програмі Avogadro або ChemOffice?
21. Що таке оптимізація геометрії та для чого вона потрібна?
22. Які типи розрахунків доступні у Gaussian?
23. Як інтерпретувати результати квантово-хімічних обчислень?
24. Наведіть приклади реальних досліджень, де використовують методи комп'ютерної хімії.
25. Які переваги та недоліки комп'ютерної хімії порівняно з експериментом?
26. Які основні тенденції розвитку комп'ютерної хімії у світі?

Відповідно до «Положення про взаємодію формальної та неформальної освіти, визнання результатів навчання (здобутих шляхом неформальної та / або інформальної освіти, у системі формальної освіти) ЧНУ» https://drive.google.com/file/d/1O7Chn1UqlqjW_JybxDr-syswxxHuGOn/view у процесі вивчення дисципліни здобувачу освіти може бути зараховано до 25 % балів, отриманих за результатами неформальної та / або інформальної освіти з проблем, які відповідають тематиці курсу.

Рекомендована література Основна

1. Cramer C. J. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. Wiley, 2013.
2. Jensen F. *Introduction to Computational Chemistry*. Wiley, 2017.
3. Szabo A., Ostlund N. S. *Modern Quantum Chemistry*. Dover, 2012.
4. **Вакарчук І. О.** *Квантова механіка* (4-те видання, доопрацьоване), Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2012. — 872 с.
5. **Нікітін О. Є., Соколова С. І.** *Квантова хімія та комп'ютерне моделювання*, К.: Наукова думка, 2020.
6. Бондар О.С. *Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник* / О.С. Бондар Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.

Додаткова

1. Hehre W. J. *A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations*. Wavefunction, 2003.
2. Leach A. R. *Molecular Modelling: Principles and Applications*. Pearson, 2010.
3. Никітін О. Є., Соколова С. І. *Квантова хімія та комп'ютерне моделювання*. – К.: Наукова думка, 2020.
4. **Стеценко Н.О., Дегтярьов Л.С., Фролова Н.Е., Іванова В.Д.** *Основи комп'ютерної хімії біологічно активних речовин* — конспект лекцій, НУХТ, 2012.

Посилання на інформаційні ресурси

<https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=2978> дистанційне навчання дисципліни (платформа Moodle)

Політика академічної доброчесності

Дотримання політики щодо академічної доброчесності учасниками освітнього процесу при вивченні навчальної дисципліни «Методи контролю якості харчової продукції» регламентовано такими документами:

«Етичний кодекс Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича» <https://www.chnu.edu.ua/media/jxdfs0zb/etychnyi-kodeks-chemivetskoho-natsionalnoho-universytetu.pdf>;

«Положенням Про виявлення та запобігання академічному плагіату у Чернівецькому національному університету імені Юрія Федьковича» <https://www.chnu.edu.ua/universytet/normatyvni-dokumenty/polozhennia-pro-vyavlennia-ta-zapobihannia-akademichnomu-plahiatu/>